



TITLE:

電子相関による金属非金属転移(基  
研研究会「電子相関と金属非金属  
転移」報告)

AUTHOR(S):

川畑, 有郷

---

CITATION:

川畑, 有郷. 電子相関による金属非金属転移(基研研究会「電子相関と金属非金属転移」報告). 物性研究 1976, 25(6): B32-B34

ISSUE DATE:

1976-03-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/89102>

RIGHT:

を計算するとこの局在モーメント消失温度近傍では, random magnetic field の熱ゆらぎの増加がある。これが帯磁率の温度変化に小さな異常 ( $\chi(T)^{-1}$  の曲線が軽く折れ曲る) を与えている。自由エネルギーの温度変化は atomic limit の場合と大体似ている。 $k_B T/W \lesssim 0.21$  では温度変化が  $F^{(2)}(\xi_i)$  からの寄与(局在的)に特長づけられ  $k_B T/W \gtrsim 0.21$  では  $F^{(1)}$  からの寄与(バンド的)に特長づけられている。比熱の温度変化については,  $k_B T/W \simeq 0.2$  に1個のピークを持つ。

(尚, この話の詳しい内容は J. Phys. Soc. Japan 40 (1976) Apr. に掲載される予定です。)

### 参 考 文 献

- 1) W. E. Evenson, J. R. Schrieffer and S. Q. Wang: J. Appl. Phys. 41 (1970) 1199

## 電子相関による金属非金属転移

川 畑 有 郷

金属非金属転移は色々な物質に見られ,<sup>1)</sup> その様子は物質により色々である。そのメカニズムも物質により異なると思われるが, ここでは  $V_2 O_3$  について考える。問題にするのは, paramagnetic な金属相と絶縁体相の boundary である。この phase boundary は critical point をもつので<sup>2)</sup> gas-liquid transition と同様に, 金属と絶縁体の間には本質的な差はないと考えられる。モデルとしては, Hubbard モデルをとり,

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + I \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (1)$$

transfer energy  $t_{ij}$  が系の体積によるとする。実験的には, 転移は圧力によって起こっており, 転移に際して体積変化が見られるのでこのようなモデルを取った。系の自由エネルギー  $F(V)$  ( $V$  は系の体積) は

$$\frac{\partial F}{\partial V} = \sum_{i,j,\sigma} (\partial t_{ij} / \partial V) \langle c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} \rangle$$

で与えられる。 $t_{ij}$  を nearest neighbour のみにとり, 相互作用のない時のバンド巾  $\Delta$  が  $t_{ij}$  に比例することに注意すると,

$$\partial F / \partial V = \alpha K$$

$$\alpha = \partial \Delta / \partial \Omega \quad (\Omega = V/N, N \text{ は格子点の数}) \quad (3)$$

$$K = \frac{1}{N\Delta} \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} \langle c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} \rangle$$

と書ける、 $K$  は運動エネルギーであるから、系のグリーン関数<sup>3)</sup>を与えれば、計算することが出来る。この外に、格子の elastic energy を  $(NC/2)(\Omega - \Omega_0)^2$  の形で考えて  $F$  に加えると、

$$\partial F / \partial V = \alpha K + C(\Omega - \Omega_0) \equiv -P \quad (4)$$

となる。 $P$  は圧力である。 $K$  は  $\Omega$  を通じて  $\Delta$  の関数であり、転移の近くでは  $\Omega$  の変化は小さいとして  $\alpha$  が  $\Omega$  によらないとすると、

$$K(\Delta) + C'\Delta = P' \quad (5)$$

となる ( $C' = C/\alpha^2$ ,  $P' = -P/\alpha$ )。  $P'$  の原点を適当にとることとして、本質的でない項は省略した。(5) を解けば、相図が得られる。数値計算によれば、(5) は適当な  $C'$  の値を仮定すれば、高温では ( $K$  は温度による) あらゆる  $P'$  の値に対して一つの解をもち、低温では、ある範囲の  $P'$  に対して三つの根 ( $\Delta_1 < \Delta_2 < \Delta_3$ ) をもつ。 $\Delta_2$  は不安定解を与え、 $P'$  が大きい時は  $\Delta_3$  が、 $P'$  が小さい時は  $\Delta_1$  が自由エネルギー最低を与える。転相点は最低エネルギーを与える解が  $\Delta_3$  から  $\Delta_1$  に移る点であり、gas liquid transition と同様に論ずることが出来る。(3) が三重根をもつ様な温度、圧力が critical point ( $T_c, P'_c$ ) を与える。

計算は、 $T_c = 0.1I$ ,  $0.05I$  等について行われたが、転移点での  $\Delta$  のとびが 50% ぐらいにもなり、定量的には良い結果ではない。

#### 参 考 文 献

- 1) F.N.Mott and Z.Zinamon, Reports on Progress in Physics  
33 (1970), 881

- 2) 実験については, 3) の Referenos 13~17 参照
- 3) A. Kawabata, Prog. Theor. Phys. 1 (1975), 45

## Hubbard model の任意に詰まった バンド及び構造不規則な系に対する解

東大・理 青 木 秀 夫  
上 村 洸

### § 1. ま え が き

Hubbard model の物理的性質を調べる場合に, 従来しばしば alloy analogy による CPA に対応する近似が行われてきた。Alloy analogy<sup>1,2)</sup> では,  $\sigma$  スピン電子の電子構造をみる時には  $-\sigma$  スピン電子を各格子に固定させ, その不規則ポテンシャル中を一体的に  $\sigma$  スピンが運動すると見做す。しかし, 電子は  $\pm\sigma$  スピン双方が相互作用しながらダイナミカルに運動しているから, ダイナミカルな効果を考慮する必要がある。我々はその効果が Hubbard 近似<sup>1)</sup> において CPA に比べ如何なる役割りを演じているかを, 先ず任意につまったバンドについて解析し<sup>3)</sup> 明確にした。さらに Hubbard model を不純物帯に応用する為に, 不純物帯の本質的特徴の一つである構造不規則性を持つ系について, やはりダイナミカルな効果を入れて解き<sup>4)</sup> CPA との比較や金属非金属転移について論じた, 用いた Hubbard 近似は, フェルミ面での自己エネルギーの振舞等について不合理な点も指摘されているが, 金属非金属転移の overall な特徴をグリーン関数を用いて調べる為には適当であろうと思われる。

### § 2. 任意の $n_\sigma$ に対する電子構造

CPA と Hubbard 近似の差をはっきりさせる為に, half-filled ( $n_\uparrow = n_\downarrow = \frac{1}{2}$ ) バンドから  $n_\sigma$  をずらせて電子構造を求める。Hubbard 近似では自己エネルギー  $\Omega^\sigma$  は 3 項の和として表わされており, 最初の項が CPA に対応し, resonance broadening